

### Лекция 5.

- Гармонический осциллятор. Туннельные осцилляции.
- Оценочные и приближенные решения для квантовых ям.
- Момент импульса в квантовой механике. Движение в центральном поле.

### Небольшое математическое уточнение...



#### Часть 1. Квантовый осциллятор

### Гармонический осциллятор в 1D



### Гармонический осциллятор в 1D



- Точно решаема в эрмитовых функциях
- Эквидистантные уровни

$$E_n = \hbar \omega \left( n + \frac{1}{2} \right)$$
$$\omega = \sqrt{\frac{k}{m}}$$

• Имеются «нулевые колебания»

# Схематический вид волновых функций одномерного осциллятора



https://en.wikipedia.org/wiki/Quantum\_harmonic\_oscillator

# Часть 2: Туннельные осцилляции в связанных квантовых ямах











$$\hat{T}\Psi_{1,2}=\hbar T\Psi_{2,1}$$



![](_page_13_Figure_1.jpeg)

$$\Psi^{(\pm)} = \frac{1}{\sqrt{2}} (\Psi_1 \pm \Psi_2)$$
$$(\hat{H}_0 + \hat{T}) \Psi^{(\pm)} = E^{(\pm)} \Psi^{(\pm)}$$

$$E^{(\pm)} = E_0 \pm \hbar T$$

по осцилляторной теореме меньшую энергию имеет состояние без «дополнительных» нулей в.ф.

![](_page_14_Figure_1.jpeg)

![](_page_15_Figure_1.jpeg)

![](_page_16_Figure_1.jpeg)

![](_page_17_Figure_1.jpeg)

#### ямах

![](_page_18_Figure_2.jpeg)

# Часть З. Оценки и приближенные методы

![](_page_19_Figure_1.jpeg)

#### Оценки и приближенные методы

![](_page_20_Figure_1.jpeg)

![](_page_21_Figure_1.jpeg)

![](_page_22_Figure_1.jpeg)

![](_page_23_Figure_1.jpeg)

![](_page_24_Figure_1.jpeg)

![](_page_25_Figure_1.jpeg)

![](_page_26_Figure_1.jpeg)

![](_page_27_Figure_1.jpeg)

![](_page_28_Figure_1.jpeg)

Подбор удобной для вычислений волновой функции, например:

 $\Psi(x, a) = A x e^{-x/a}$ 

$$E(a) = \int \Psi^*(x, a) \hat{H} \Psi(x, a) dx > E_0$$

Минимум *E*(*a*) приближается к энергии основного состояния.

«Оптимизованная» волновая функция  $\Psi(x,a)$  будет «близка» к в.ф. основного состояния  $\Psi_0$ 

![](_page_29_Figure_1.jpeg)

![](_page_30_Figure_1.jpeg)

![](_page_31_Figure_1.jpeg)

![](_page_32_Figure_1.jpeg)

# Часть 4. Момент импульса в квантовой физике

![](_page_33_Picture_1.jpeg)

https://www.youtube.com/watch?v=DcaJQtKHm88

### Момент импульса в квантовой физике

![](_page_34_Picture_1.jpeg)

стоп-кадр из https://www.youtube.com/watch?v=DcaJQtKHm88

### Момент импульса в квантовой физике

![](_page_35_Picture_1.jpeg)

стоп-кадр из https://www.youtube.com/watch?v=DcaJQtKHm88

### Момент импульса в квантовой физике

![](_page_36_Picture_1.jpeg)

стоп-кадр из https://www.youtube.com/watch?v=DcaJQtKHm88

В стационарных состояниях *L*<sup>2</sup> должен иметь строго определенные значения, но все компоненты <u>вектора</u> *L* одновременно задать невозможно

### Немного математики в сферических координатах

![](_page_37_Figure_1.jpeg)

Spherical coordinate system

# Немного математики в сферических координатах

![](_page_38_Figure_1.jpeg)

# Немного математики в сферических координатах

![](_page_39_Figure_1.jpeg)

# Собственные значения проекции момента

$$\hat{l}_z = -i \frac{\partial}{\partial \phi} -i \frac{\partial \Psi}{\partial \phi} = m \Psi \Psi = f(r, \Theta) e^{i m \phi} + требование однозначности при повороте на 2 π$$

# Собственные значения проекции момента

![](_page_41_Figure_1.jpeg)

возможные значения от *-l* до *l* 

# Собственные значения проекции момента

![](_page_42_Figure_1.jpeg)

# Собственные значения квадрата момента. Физика.

![](_page_43_Figure_1.jpeg)

# Собственные значения квадрата момента. Математика.

$$\hat{l}^{2} = -\left(\frac{1}{\sin\Theta}\frac{\partial}{\partial\Theta}\left(\sin\Theta\frac{\partial}{\partial\Theta}\right) + \frac{1}{\sin^{2}\Theta}\frac{\partial^{2}}{\partial\phi^{2}}\right)$$
$$\hat{l}^{2}\Psi = A\Psi \text{ решается в сферических функциях, см ЛЛ.III, пар.28}$$
$$Y_{lm}(\Theta, \phi) = C_{lm}P_{l}^{|m|}(\cos\Theta)e^{im\phi}$$
собственные значения  $A = l(l+1)$ 

# Собственные значения квадрата момента. Математика.

$$\hat{l}^{2} = -\left(\frac{1}{\sin\Theta}\frac{\partial}{\partial\Theta}\left(\sin\Theta\frac{\partial}{\partial\Theta}\right) + \frac{1}{\sin^{2}\Theta}\frac{\partial^{2}}{\partial\phi^{2}}\right)$$
$$\hat{l}^{2}\Psi = A\Psi$$
 решается в сферических функциях, см ЛЛ.III, пар.28
$$Y_{lm}(\Theta, \phi) = C_{lm}P_{l}^{|m|}(\cos\Theta)e^{im\phi}$$
собственные значения  $A = l(l+1)$ 

Пространственная чётность состояния с определенным моментом импульса

$$\vec{r} \Leftrightarrow -\vec{r}$$

$$\{r, \Theta, \phi\} \Leftrightarrow \{r, \pi - \Theta, \pi + \phi\}$$

$$Y_{lm}(\pi - \Theta, \phi + \pi) = (-1)^{l} Y_{lm}(\Theta, \phi)$$

### Правила квантования момента

#### импульса

![](_page_46_Figure_2.jpeg)

- одновременно могут быть измерены проекция момента на заданную (любую, традиционно обозначается Z) ось и квадрат момента импульса
- собственные значения квадрата момента *l(l+1)*, «длиной» вектора момента импульса называют *l*
- проекция момента импульса целое число *m*=-*l*,-*l*+1...*l*-1, *l*,
   всего (2*l*+1) возможность
- чётность состояния с определённым *l* : *P*=(-1)<sup>*l*</sup>

# Часть 5. Движение в центральном поле, некоторые общие свойства

$$E\Psi = \hat{H}\Psi = \left(\frac{\hat{p}^2}{2m} + U(r)\right)\Psi = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + U(r)\right)\Psi$$

$$E\Psi = \hat{H}\Psi = \left(\frac{\hat{p}^2}{2m} + U(r)\right)\Psi = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + U(r)\right)\Psi$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial\Psi}{\partial r}\right)+U(r)\Psi+\frac{\hbar^2}{2mr^2}\hat{l}^2\Psi=E\Psi$$

$$E\Psi = \hat{H}\Psi = \left(\frac{\hat{p}^2}{2m} + U(r)\right)\Psi = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + U(r)\right)\Psi$$

$$-\frac{\hbar^{2}}{2m}\frac{1}{r^{2}}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^{2}\frac{\partial\Psi}{\partial r}\right)+U(r)\Psi+\frac{\hbar^{2}}{2mr^{2}}\hat{l}^{2}\Psi=E\Psi$$
  
действует только  
на радиальную  
часть  
часть

$$E\Psi = \hat{H}\Psi = \left(\frac{\hat{p}^2}{2m} + U(r)\right)\Psi = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + U(r)\right)\Psi$$

$$\Psi = \frac{\xi(r)}{r} \times Y_{lm}(\Theta, \phi)$$

$$-\frac{\hbar^{2}}{2m}\xi''+\left(U(r)+\frac{l(l+1)}{r^{2}}\right)\xi=E\xi$$
  
Сведена к одномерной задаче, *r>0*  
$$E\Psi=\hat{H}\Psi= \underbrace{\Psi(r,\Theta,\phi)=\Psi_{n_{r},l,m}}_{E=E(n_{r},l)}$$
  
$$\underbrace{\frac{2m r^{2}\partial r}{\partial r}}_{\text{действует только}} \underbrace{2mr^{2}}_{\text{действует только на угловую часть}}$$

$$\Psi = \frac{\xi(r)}{r} \times Y_{lm}(\Theta, \phi)$$

$$-\frac{\hbar^{2}}{2m}\xi''+\left(U(r)+\frac{l(l+1)}{r^{2}}\right)\xi=E\xi$$
  
Сведена к одномерной задаче,  $r>0$   
 $E\Psi=\hat{H}\Psi=$   
 $\Psi(r,\Theta,\phi)=\Psi_{n,l,m}$   
 $E=E(n_{r},l)$   
Квантовые числа:  
•  $n_{r}$ — радиальное  
(0,1,2...)  
•  $l$ — орбитальное  
 $\{s,p,d,f..\}=\{0,1,2,3..\}$   
•  $m$ — магнитное

$$\Psi = \frac{\xi(r)}{r} \times Y_{lm}(\Theta, \phi)$$

![](_page_54_Figure_0.jpeg)

# Вид некоторых волновых функций (угловая часть).

![](_page_55_Figure_1.jpeg)

# Часть 6. Трехмерный осциллятор и кулоновское поле

### Трёхмерный осциллятор U=kr<sup>2</sup>/2

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi + \frac{kr^2}{2}\Psi = E\Psi$$

![](_page_57_Figure_2.jpeg)

### Трёхмерный осциллятор U=kr<sup>2</sup>/2

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi + \frac{kr^2}{2}\Psi = E\Psi$$

![](_page_58_Figure_2.jpeg)

![](_page_59_Figure_0.jpeg)

![](_page_60_Figure_0.jpeg)

![](_page_61_Figure_1.jpeg)

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi - \frac{e^2}{r}\Psi = E\Psi$$
$$-\frac{\hbar^2}{2m}\xi'' + \left(-\frac{e^2}{r} + \frac{l(l+1)}{r^2}\right)\xi = E\xi$$

$$\Psi = \frac{\xi(r)}{r} \times Y_{lm}(\Theta, \phi)$$

![](_page_63_Figure_1.jpeg)

$$\begin{bmatrix} -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi - \frac{e^2}{r}\Psi = E\Psi\\ -\frac{\hbar^2}{2m}\xi'' + \left(-\frac{e^2}{r} + \frac{l(l+1)}{r^2}\right)\xi = E\xi \end{bmatrix}$$

$$\Psi = \frac{\xi(r)}{r} \times Y_{lm}(\Theta, \phi)$$

Только ответы:

- 1) случайное вырождение по орбитальному квантовому числу
- 2) энергию определяет главное квантовое число  $n = n_r + l + l$

3) возможные значения момента l=0, 1...(n-1)

 $E_n = -\frac{m e^4}{2 \hbar^2} \frac{1}{n^2}$  13.6 3B

#### Основное на лекции

![](_page_65_Figure_1.jpeg)